4300375 - Física moderna I

Aula 10 – O oscilador harmônico

Um retorno ao começo...

Nesta aula...

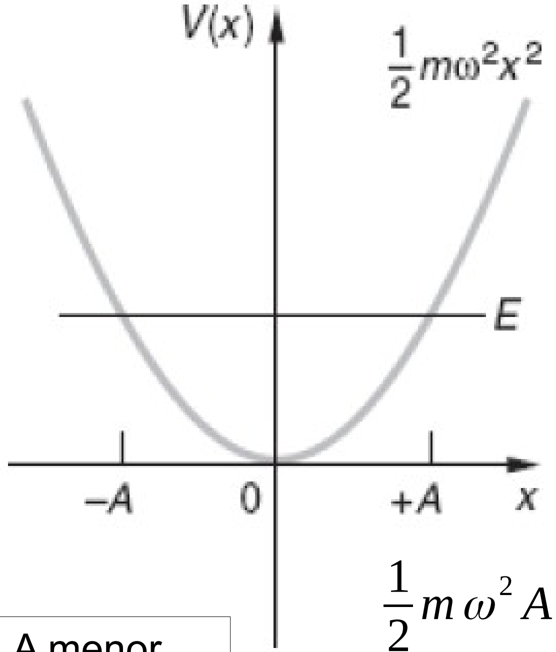
- Soluções da equação de Schrödinger para um potencial contínuo
  - O caso clássico
  - Soluções para as funções de onda
  - Energia quantizada
  - Emissão de fótons

O oscilador harmônico clássico

- Potencial de uma força restauradora
  - Sistema massa mola
- Frequência natural de oscilação ω

$$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad \omega=(K/m)^{1/2}=2\pi\nu$$

- Energia mecânica: $\frac{1}{2}mv^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$



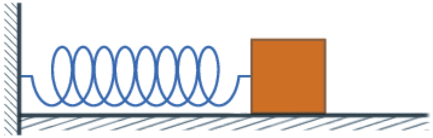
$$\frac{1}{2}m\omega^2A^2=E$$

$$A=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

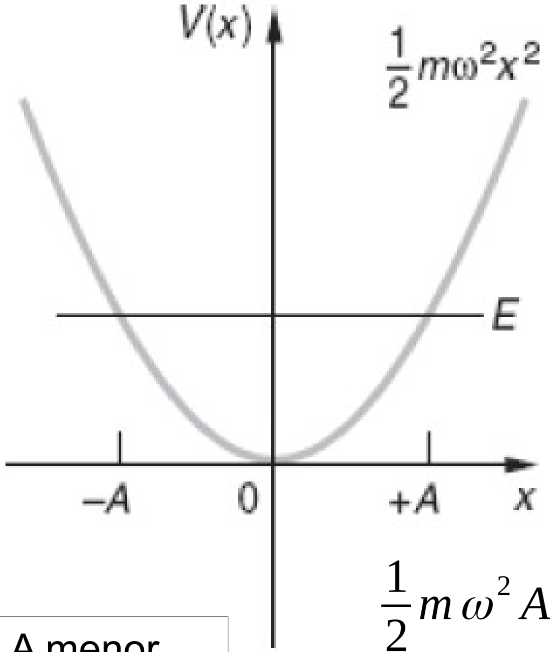
$$v=\sqrt{(2/m)\left(E-\frac{1}{2}m\omega x^2\right)}$$

Qualquer valor da energia E é permitido. A menor energia é $E = 0$, que corresponde ao caso em que a partícula se encontra em repouso na origem.

O oscilador harmônico clássico



- Potencial de uma força restauradora
  - Sistema massa mola



- Frequência natural de oscilação ω

$$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad \omega=(K/m)^{1/2}=2\pi\nu$$

- Energia mecânica: $\frac{1}{2}mv^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$

$$\frac{1}{2}m\omega^2A^2=E$$

$$A=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

$$v=\sqrt{(2/m)\left(E-\frac{1}{2}m\omega x^2\right)}$$

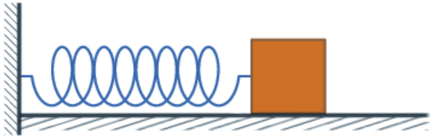
Qualquer valor da energia E é permitido. A menor energia é $E=0$, que corresponde ao caso em que a partícula se encontra em repouso na origem.

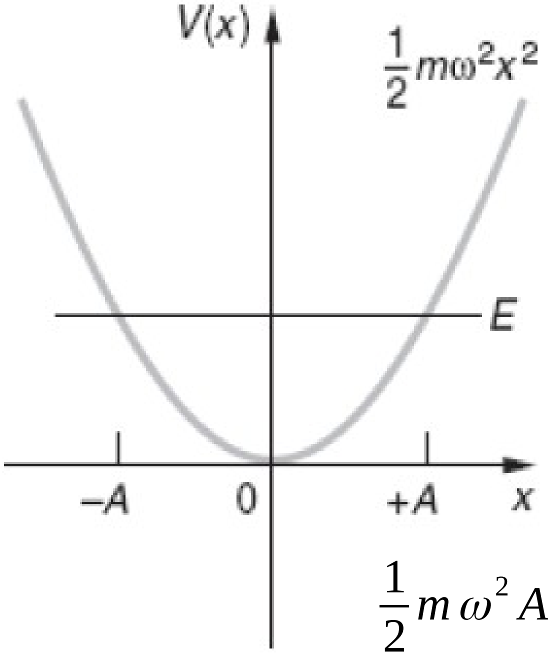
O oscilador harmônico clássico

$$v=\sqrt{(2/m)\left(E-\frac{1}{2}m\,\omega x^2\right)}$$

- A probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x+dx$ é proporcional ao tempo que a partícula leva para percorrer esse trecho

$$\boxed{P(x)\,dx\propto\frac{dx}{v}=\frac{dx}{\sqrt{(2/m)\left(E-\frac{1}{2}m\,\omega x^2\right)}}}$$





$$\frac{1}{2}m\,\omega^2A^2=E$$

$$A=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

O oscilador harmônico quântico

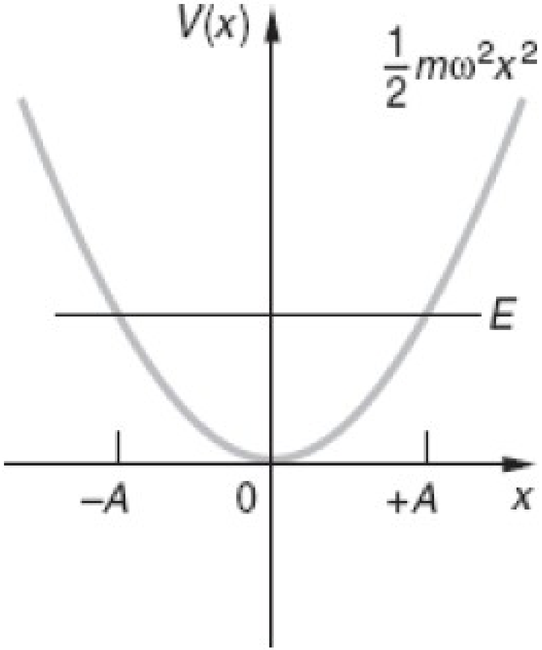
- Potencial de uma força restauradora
  - Sistema massa mola
- Equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)}$$

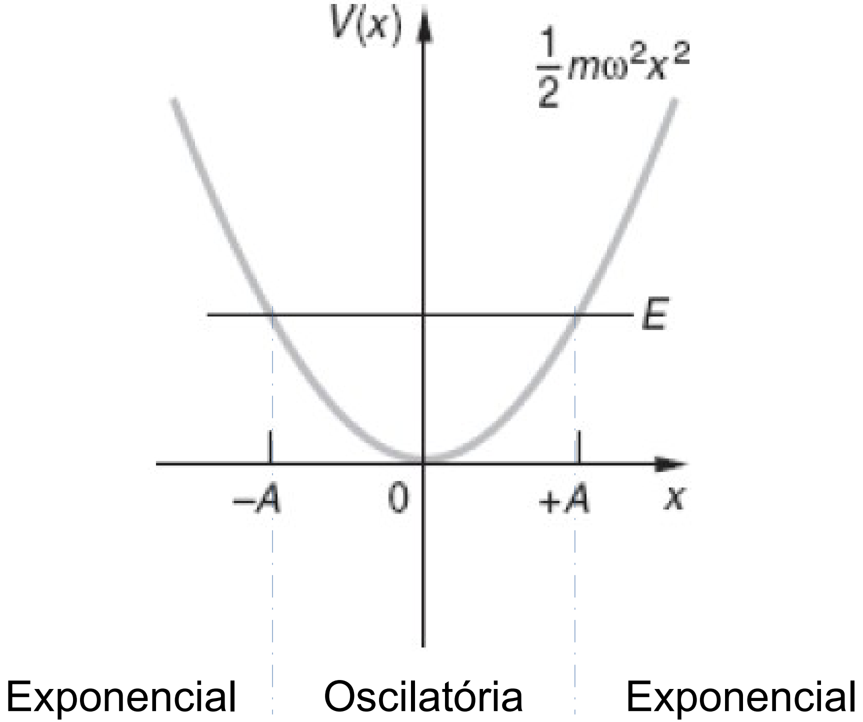
- Energia mecânica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\,\psi(x)$$

O oscilador harmônico quântico



O oscilador harmônico quântico



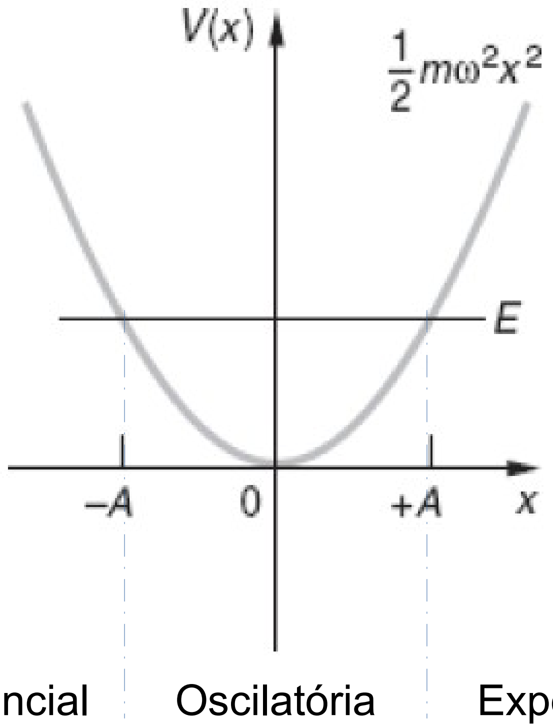
O oscilador harmônico quântico

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x)$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}E\right)\psi(x)$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \left(\alpha^2 x^2 - \beta\right)\psi(x)$$

$$\alpha^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta = \frac{2m}{\hbar^2}E$$



Exponencial Oscilatória Exponencial

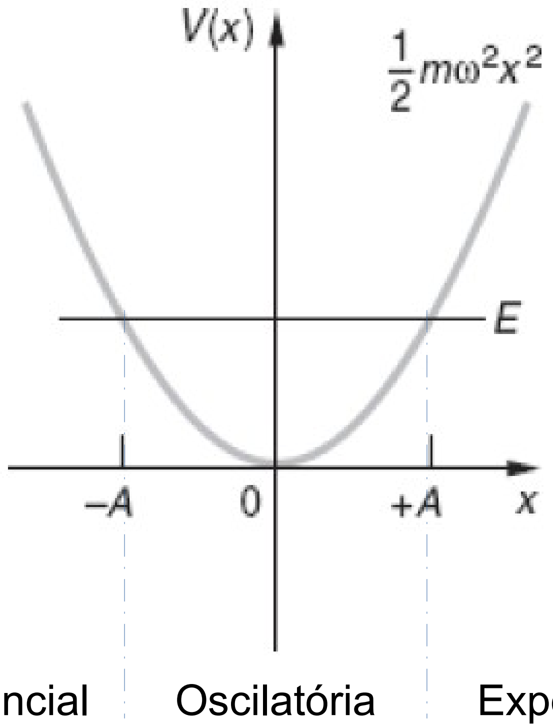
O oscilador harmônico quântico

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x)$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}E\right)\psi(x)$$

$$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = (\alpha^2 x^2 - \beta)\psi(x)}$$

$$\alpha^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta = \frac{2m}{\hbar^2}E$$



Exponencial　Oscilatória　Exponencial

O oscilador harmônico quântico

- Reescrevendo: $\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}=(\alpha^2 x^2-\beta)\psi(x)}$ $\alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$ $\beta=\frac{2m}{\hbar^2}E$

O oscilador harmônico quântico

- Reescrevendo: $$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}=(\alpha^2 x^2-\beta)\psi(x)}$$

$$\alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta=\frac{2m}{\hbar^2}E$$

Zoológico
das equações diferenciais

O oscilador harmônico quântico

- Reesccrevendo: $\boxed{\dfrac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \left(\alpha^2 x^2 - \beta\right)\psi(x)}$ $\qquad \alpha^2 = \dfrac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta = \dfrac{2m}{\hbar^2}E$
  - Tem solução na forma: $\psi(x) = H_n(x)\, e^{-\alpha x^2/2}$
- Substituindo na equação diferencial:

$$H_n''(x)\, e^{-\alpha x^2/2} - 2\alpha x H_n'(x)\, e^{-\alpha x^2/2} + (\beta - \alpha) H_n(x)\, e^{-\alpha x^2/2} = 0$$

$$H_n''(x) - 2\alpha x H_n'(x) + (\beta - \alpha) H_n(x) = 0$$

O oscilador harmônico quântico

- Reescrevendo: $$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}=(\alpha^2 x^2-\beta)\psi(x)}$$ $$\alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta=\frac{2m}{\hbar^2}E$$
  - Tem solução na forma: $\psi(x)=H_n(x)e^{-\alpha x^2/2}$
- Substituindo na equação diferencial:

$$H_n''(x)e^{-\alpha x^2/2}-2\alpha x H_n'(x)e^{-\alpha x^2/2}+(\beta-\alpha)H_n(x)e^{-\alpha x^2/2}=0$$

$$H_n''(x)-2\alpha x H_n'(x)+(\beta-\alpha)H_n(x)=0$$

- Vamos agora tomar uma solução dada por uma expansão em série:

$$H_n(x)=\sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n$$

O oscilador harmônico quântico

- Reescrevendo: $$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}=(\alpha^2 x^2-\beta)\,\psi(x)}$$ $$\alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta=\frac{2m}{\hbar^2}E$$
  - Tem solução na forma: $\psi(x)=H_n(x)\,e^{-\alpha x^2/2}$
- Substituindo na equação diferencial:

$$H_n''(x)\,e^{-\alpha x^2/2}-2\alpha x H_n'(x)\,e^{-\alpha x^2/2}+(\beta-\alpha)H_n(x)\,e^{-\alpha x^2/2}=0$$

$$H_n''(x)-2\alpha x H_n'(x)+(\beta-\alpha)H_n(x)=0$$

- Vamos agora tomar uma solução dada por uma expansão em série:

$$H_n(x)=\sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n \quad \begin{cases} H_n'(x)=\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} C_n n x^{n-1}=\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1}(n+1)x^n \\ H_n''(x)=\displaystyle\sum_{n=2}^{\infty} C_n n(n-1)x^{n-2}=\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)x^n \end{cases}$$

O oscilador harmônico quântico

$$H_n''(x) - 2\alpha x H_n'(x) + (\beta - \alpha) H_n(x) = 0$$

$$H_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n \quad \begin{cases} H_n'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1}(n+1) x^n \\ H_n''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} C_n n(n-1) x^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1) x^n \end{cases}$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} C_n n(n-1) x^{n-2} - 2\alpha x \sum_{n=1}^{\infty} C_n n x^{n-1} + (\beta - \alpha) \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1) x^n - 2\alpha \sum_{n=0}^{\infty} C_n n x^n + (\beta - \alpha) \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n = 0$$

O oscilador harmônico quântico

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)x^n - 2\alpha \sum_{n=0}^{\infty} C_n n x^n + (\beta-\alpha)\sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[C_{n+2}(n+2)(n+1) - 2\alpha n C_n + (\beta-\alpha)C_n\right] x^n = 0$$

$$C_{n+2}(n+2)(n+1) + [\beta - \alpha(1+2n)]C_n = 0$$

$$C_{n+2} = \frac{[-\beta+\alpha(1+2n)]}{(n+2)(n+1)} C_n$$

$$-\beta + \alpha(1+2n) = 0 \qquad \beta = \alpha(1+2n)$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = \frac{m\omega}{\hbar}(1+2n)$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}(1+2n) = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)$$

$$\alpha^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \qquad \beta = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

O oscilador harmônico quântico

- A solução tem a forma: $\psi(x)=\left(\sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n\right) e^{-\alpha x^2/2}$ $\quad \alpha^2=\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$ $\quad \beta=\frac{2m}{\hbar^2}E$
  - Com coeficientes: $C_{n+2}=C_n\frac{[\beta-\alpha(1+2n)]}{(n+2)(n+1)}$
- Para que esta solução seja normalizável, temos de impor que os coeficientes mais altos sejam nulos.
  - A melhor forma de fazer isso é:

$$\boxed{E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{para} \quad n=0,1,2,\ldots}$$

Energia dos estados quânticos!

O oscilador harmônico quântico

- A solução final tem então a forma:

$$\psi_n(x) = A_n H_n(x) e^{-\alpha x^2/2}$$

  - Onde A_n é uma constante de normalização e $H_n(x)$ denota uma função especial, denominada polinômio de Hermite

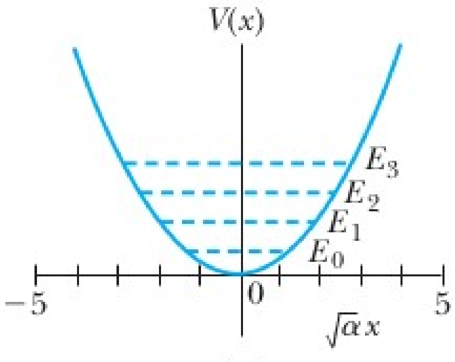
<u>Funções de onda</u>

$$\psi_3 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\alpha}\, x (2\alpha x^2 - 3) e^{-\alpha x^2/2}$$

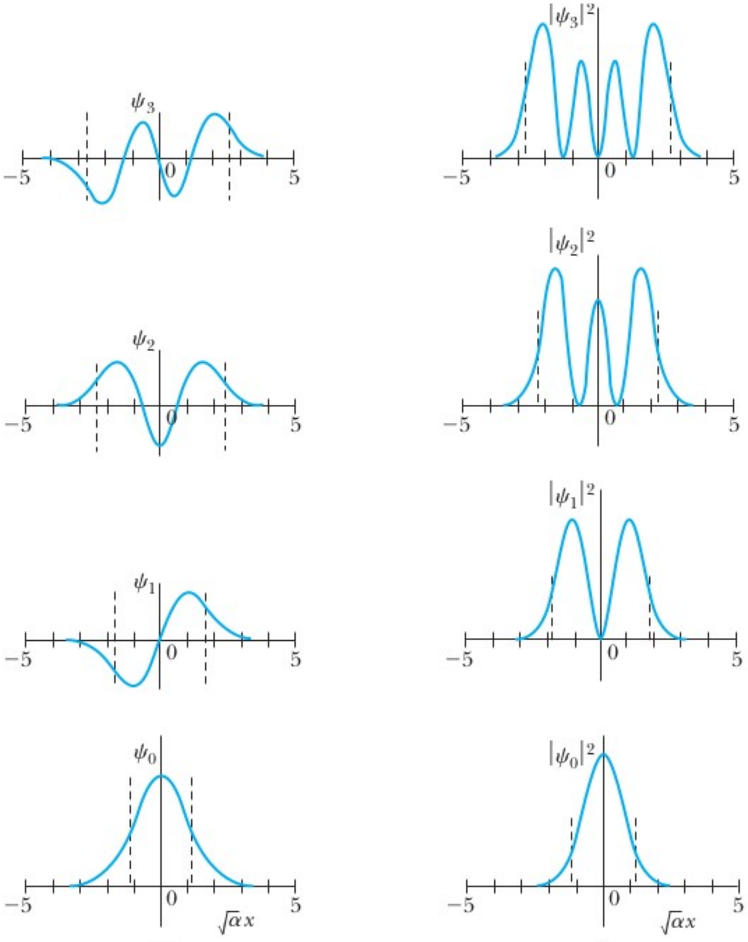
$$\psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2\alpha}\, x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$



(a)



(b) (c)

O oscilador harmônico quântico

- A solução final tem então a forma:

$$\psi_n(x) = A_n H_n(x) e^{-\alpha x^2/2}$$

  - Onde A_n é uma constante de normalização e $H_n(x)$ denota uma função especial, denominada polinômio de Hermite

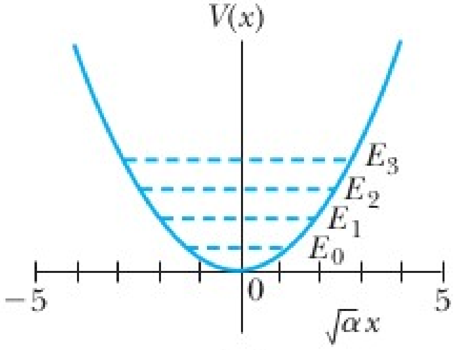
<u>Funções de onda</u>

$$\psi_3 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\alpha}\, x (2\alpha x^2 - 3) e^{-\alpha x^2/2}$$

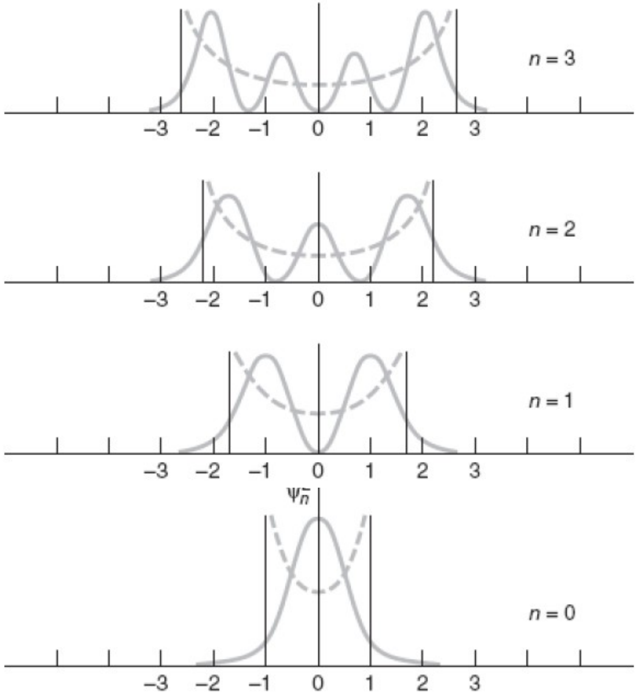
$$\psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2\alpha}\, x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$



(a)



Curva cheia é a densidade de probabilidade quântica, já a tracejada é a clássica.

O oscilador harmônico quântico

- A solução final tem então a forma:

$$\psi_n(x) = A_n H_n(x) e^{-\alpha x^2/2}$$

  – Onde A_n é uma constante de normalização e $H_n(x)$ denota uma função especial, denominada polinômio de Hermite

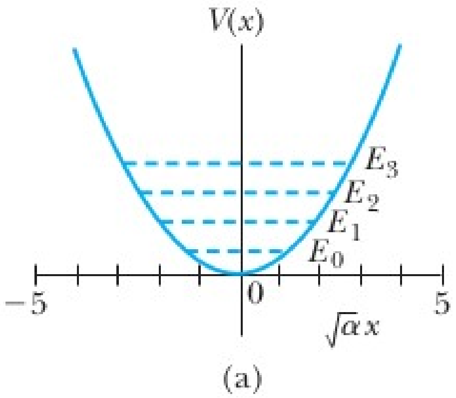
<u>Funções de onda</u>

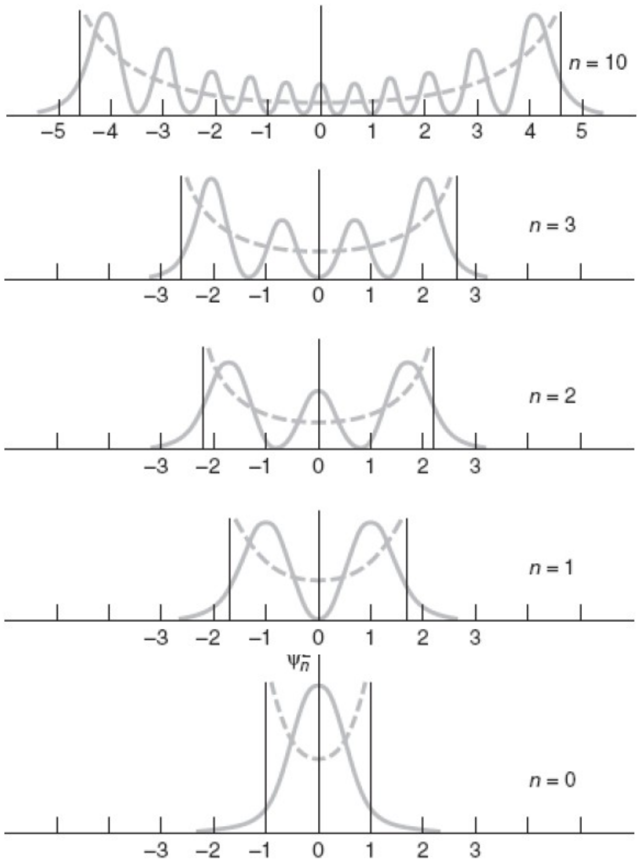
$$\psi_3 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\alpha}\, x (2\alpha x^2 - 3) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2\alpha}\, x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$





Curva cheia é a densidade de probabilidade quântica, já a tracejada é a clássica.

O oscilador harmônico quântico

- Energia do fóton emitido ou absorvido na transição: $E_{\text{fóton}} = \Delta E = E_{n\,\mathrm{i}} - E_{n\,\mathrm{f}}$
- Sendo as energias dos estados dadas por:

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega \quad \text{para} \quad n = 0, 1, 2, \ldots}$$

Energia dos estados quânticos!

- Assim: $E_{\text{fóton}} = \left(n_{\mathrm{i}} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega - \left(n_{\mathrm{f}} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega$ $\quad \boxed{E_{\text{fóton}} = (n_{\mathrm{i}} - n_{\mathrm{f}})\,\hbar\,\omega = n \cdot \hbar\,\omega = n \cdot h\,\nu}$

O oscilador harmônico quântico

- Energia do fóton emitido ou absorvido na transição: $E_{\text{fóton}} = \Delta E = E_{n\,\text{i}} - E_{n\,\text{f}}$
- Sendo as energias dos estados dadas por:

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega \quad \text{para} \quad n = 0, 1, 2, \ldots}$$

Energia dos estados quânticos!

- Assim: $E_{\text{fóton}} = \left(n_{\text{i}} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega - \left(n_{\text{f}} + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega$ $\boxed{E_{\text{fóton}} = (n_{\text{i}} - n_{\text{f}})\hbar\,\omega = n \cdot \hbar\,\omega = n \cdot h\,\nu}$

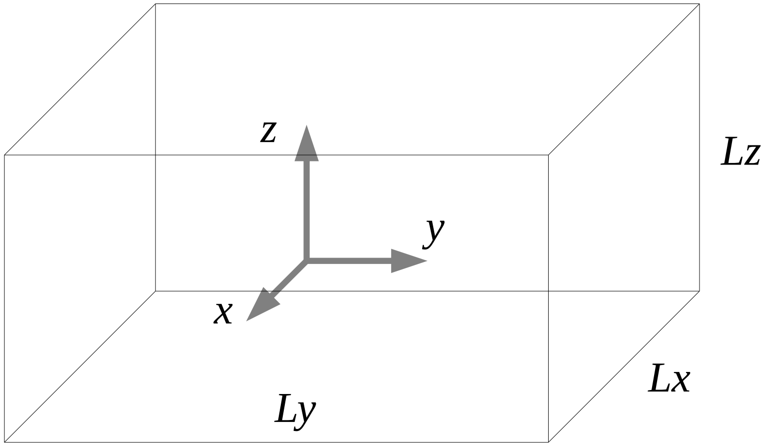
- Onde ouvimos falar de osciladores harmônicos?
  - Nas paredes do corpo negro de Planck!

Resumo...

- Vimos como achar soluções da equação de Schrödinger para potencial contínuo
- O potencial do oscilador harmônico é um potencial de aprisionamento, logo possui estados ligados e discretos
- As funções de onda, neste caso, envolvem funções especiais (polinômios de Hermite)
- Os estados quânticos tem energia: $\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{para} \quad n = 0, 1, 2, \ldots}$
- Energia do fóton emitido é múltiplo de $h\nu$

Problemas reais

- Para resolver a função de onda para problemas reais precisamos **discutir a equação de Schrödinger em três dimensões**
- Vamos analisar as **propriedades em três dimensões** em um caso mais simples: **a partícula numa caixa**
  - **Generalização 3D do poço infinito**



$$V(x,y,z) = \begin{cases} V=\infty \text{ ou } 0 \text{ se } 0<x<L_x \\ V=\infty \text{ ou } 0 \text{ se } 0<y<L_y \\ V=\infty \text{ ou } 0 \text{ se } 0<z<L_z \end{cases}$$

Como fica a equação de Schrödinger

- A equação de **Schrödinger tridimensional**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)}_{\nabla^2\psi}+V(x,y,z)\,\psi=E\,\psi$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x,y,z)\,\psi=E\,\psi}$$

- Como resolver uma equação assim?
  - **Variáveis acopladas**
  - Potencial tridimensional

Como fica a equação de Schrödinger

- A equação de **Schrödinger tridimensional**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)}_{\nabla^2\psi}+V(x,y,z)\,\psi=E\,\psi$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x,y,z)\,\psi=E\,\psi}$$

- Como resolver uma equação assim?
  - **Variáveis acopladas**
  - Potencial tridimensional
  - Separação de variáveis → $\psi(x,y,z)=\psi(x).\psi(y).\psi(z)=\psi_x.\psi_y.\psi_z$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_y\psi_z\frac{d^2\psi_x}{dx^2}+\psi_x\psi_z\frac{d^2\psi_y}{dy^2}+\psi_x\psi_y\frac{d^2\psi_z}{dz^2}\right)+V(x,y,z)\,\psi_x\psi_y\psi_z=E\,\psi_x\psi_y\psi_z}$$

Separando variáveis...

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_y\,\psi_z\frac{d^2\,\psi_x}{d\,x^2}+\psi_x\,\psi_z\frac{d^2\,\psi_y}{d\,y^2}+\psi_x\,\psi_y\frac{d^2\,\psi_z}{d\,z^2}\right)+V(x,y,z)\,\psi_x\,\psi_y\,\psi_z=E\,\psi_x\,\psi_y\,\psi_z$$

Dividindo ambos os lados por: $\psi(x,y,z)=\psi(x).\psi(y).\psi(z)=\psi_x.\psi_y.\psi_z$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\,\psi_x}{d\,x^2}+\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\,\psi_y}{d\,y^2}+\frac{1}{\psi_z}\frac{d^2\,\psi_z}{d\,z^2}\right)=E-V(x,y,z)$$

- Supondo que dentro do poço, $V(x,y,z)=0$ resulta em:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\,\psi_x}{d\,x^2}+\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\,\psi_y}{d\,y^2}+\frac{1}{\psi_z}\frac{d^2\,\psi_z}{d\,z^2}\right)=E}$$

Separando variáveis...

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2}+\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2}+\frac{1}{\psi_z}\frac{d^2\psi_z}{dz^2}\right)=E}$$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2}\right)=E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2}\right)=E_y \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_z}\frac{d^2\psi_z}{dz^2}\right)=E_z \end{cases}$$

- Com: $E=E_x+E_y+E_z$
- **Equações separadas!**
- E agora? O que isso lembra?

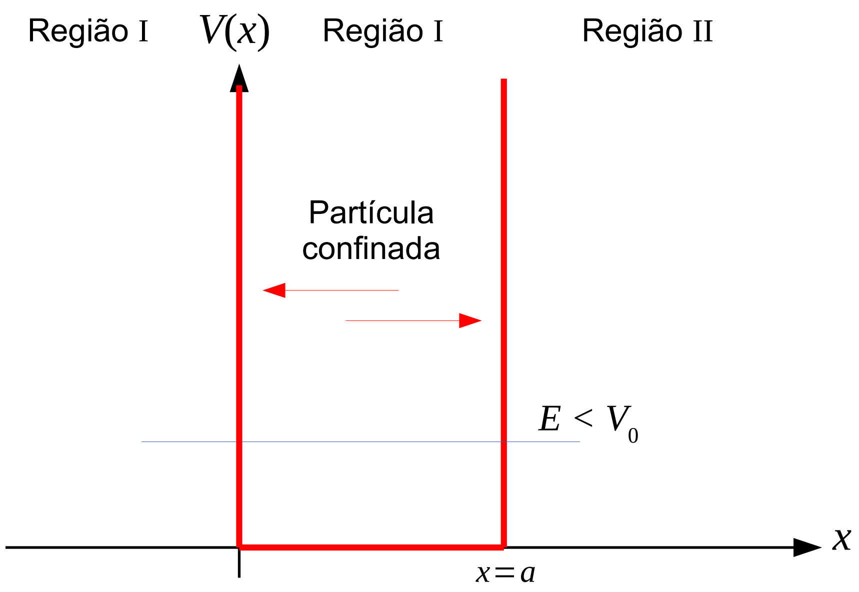
Separando variáveis...

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2}+\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2}+\frac{1}{\psi_z}\frac{d^2\psi_z}{dz^2}\right)=E}$$

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{1}{\psi_x}\dfrac{d^2\psi_x}{dx^2}\right)=E_x\\[2ex]-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{1}{\psi_y}\dfrac{d^2\psi_y}{dy^2}\right)=E_y\\[2ex]-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{1}{\psi_z}\dfrac{d^2\psi_z}{dz^2}\right)=E_z\end{cases}$$

Zoológico
das equações diferenciais

O poço quadrado unidimensional



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Soluções:

$$k_{II}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad k_I=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

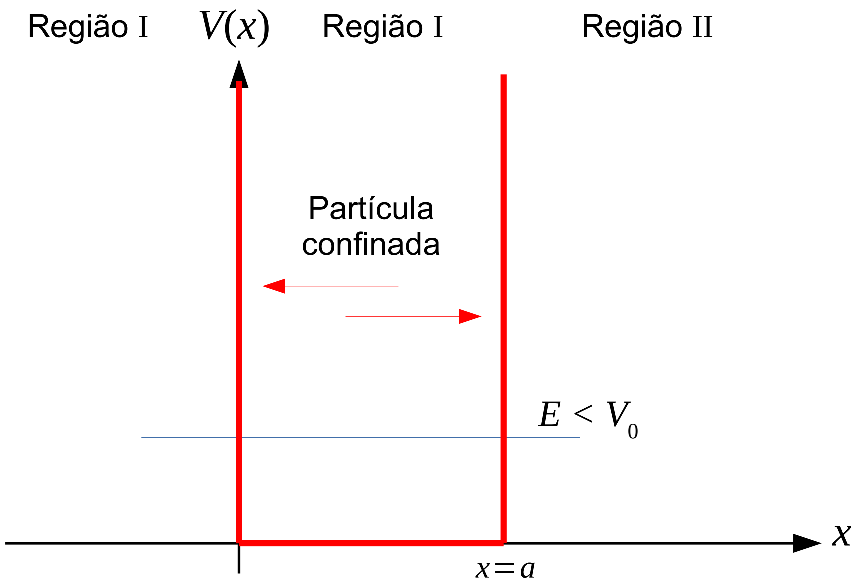
$$\psi_I(x)=A.e^{k_I x} \qquad (x<0)$$
$$\psi_{II}(x)=C_c.\cos(k_{II}x)+C_s.\mathrm{sen}(k_{II}x) \qquad (0<x<a)$$
$$\psi_{III}(x)=G.e^{-k_I x} \qquad (a<x)$$

Note que, se $V_0 >> E$:
$$\begin{cases}\psi_I(x)\rightarrow 0 & (x<0)\\ \psi_{III}(x)\rightarrow 0 & (a<x)\end{cases}$$

Soluções ($V_0 >> E$):

$$\psi_I(x)=0 \qquad (x<0)$$
$$\psi_{II}(x)=C_s.\mathrm{sen}(k_{II}x) \qquad (0<x<a)$$
$$\psi_{III}(x)=0 \qquad (a<x)$$

O poço quadrado unidimensional



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Soluções:

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0)=0 \Rightarrow \text{sen}(0)=0$$

$$\psi_{II}(a)=\psi_{III}(a)=0 \Rightarrow \underline{\text{sen}(k_{II}a)=0}$$

$$\boxed{k_{II}a=n\pi \quad \Rightarrow \quad E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}}$$

A função de onda final

- **Cada coordenada tem como solução uma onda independente**
- Os eixos individualmente tem soluções de poço unidimensional

$$\psi_x(x)=\sqrt{\left(\frac{2}{L_x}\right)}\text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \quad \text{com } n_x=1,2,3,\ldots$$

$$\psi_y(y)=\sqrt{\left(\frac{2}{L_y}\right)}\text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad \text{com } n_y=1,2,3,\ldots$$

$$\psi_z(z)=\sqrt{\left(\frac{2}{L_z}\right)}\text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \quad \text{com } n_z=1,2,3,\ldots$$

$$\boxed{\begin{gathered}\psi(x,y,z)=\psi_x.\psi_y.\psi_z=A.\text{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right).\text{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right).\text{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)\\ \text{com } n_x,n_y,n_z=1,2,3,\ldots\end{gathered}}$$

E a energia dos estados?

- **Agora, a energia total é definida por três números quânticos!**
- Um estado quântico é totalmente descrito por estes três números
  - Notação {111}, {112}, {121}, {211}, etc.

$$E_x=\frac{p_x^2}{2m}=\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2 n_x^2}{2mL_x^2}$$

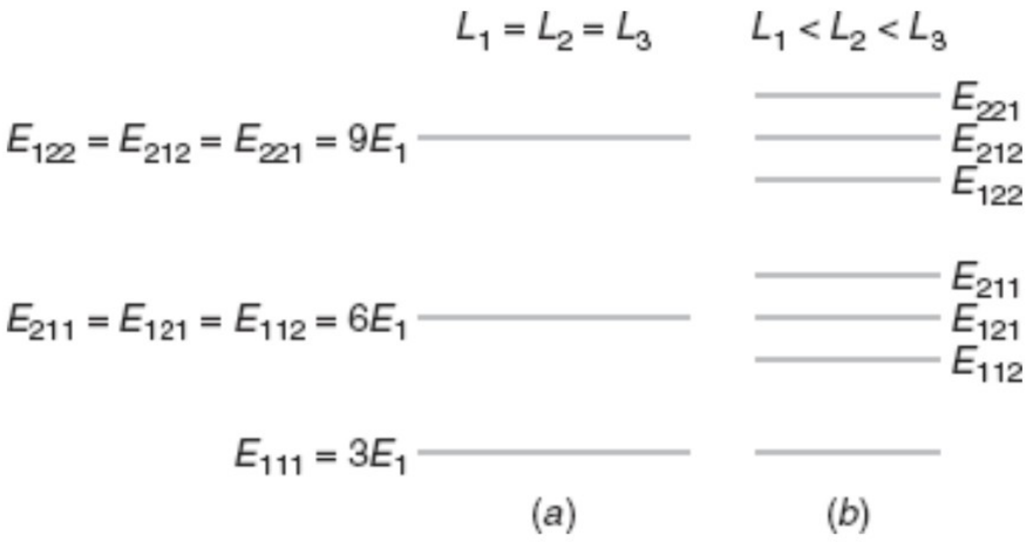
$$E_y=\frac{p_y^2}{2m}=\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2 n_y^2}{2mL_y^2}$$

$$E_z=\frac{p_z^2}{2m}=\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2 n_z^2}{2mL_z^2}$$

$$\boxed{E=E_x+E_y+E_z=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{p_y^2}{2m}+\frac{p_z^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right)}$$

E a energia dos estados?

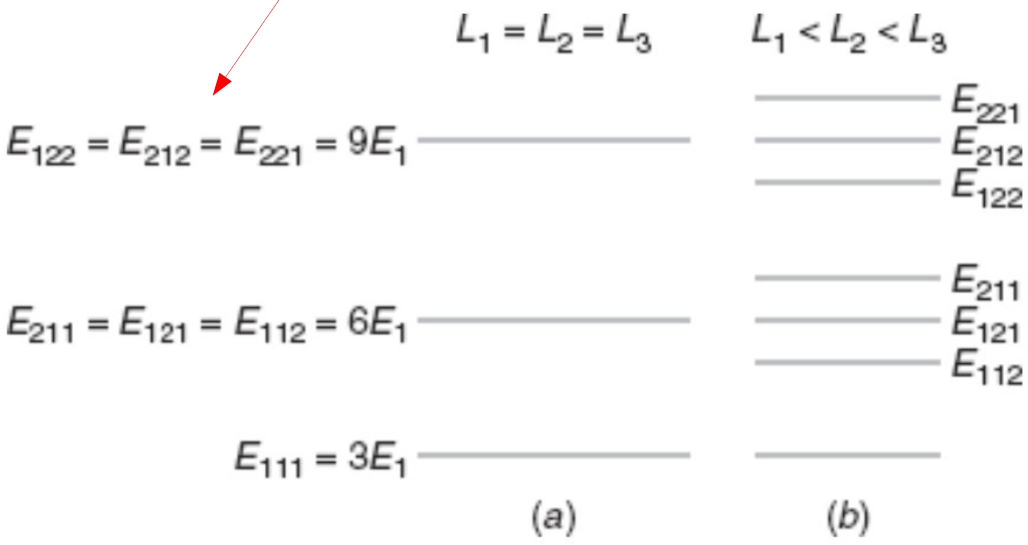
- Agora suponha que o potencial represente uma caixa com **lados todos diferentes**
- **Cada número quântico contribui diferentemente para a energia final**
- Note que agora os estados têm energias diferentes!



E a energia dos estados?

- Agora suponha que o potencial represente uma caixa com **lados todos diferentes**
- **Cada número quântico contribui diferentemente para a energia final**
- Note que agora os estados têm energias diferentes!

Estados degenerados!



Para um observador externo, é impossível distinguir os estados de mesma energia no caso da caixa cúbica!

Esse fato é chamado degenerescência!

Resumo...

- Equação de Schrödinger para o caso da caixa tridimensional
- Cada dimensão adiciona um número quântico ao problema
- Simetrias levam à degenerescências
- Agora estamos prontos para abordar o átomo com a metodologia da nova mecânica quântica

Na próxima aula...

- Começaremos a resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio:
  - Separação de variáveis
  - Distribuição angular e nuvem eletrônica
  - Quantização da energia e do momento angular